数理解析研究所講究録
第 1698 巻 2010 年 183-187

神経回路網と幾何学の接点

福水　健次
情報･システム研究機構　統計数理研究所
総合研究大学院大学

RIMS共同研究：離散力学系の分子細胞生物学への応用数理
「神経システムと代数幾何」パネルディスカッション
2009.1.5 – 1.9 京都大学

1

自己紹介

大学：　京都大学理学部数学教室　（ここ）

1989.-　（株）リコー　中央研究所

1998.-　理化学研究所　脳科学総合研究センター

2000.-　統計数理研究所. 現職
統計的学習、機械学習の研究

2

- 自己紹介：京大理数→1989（株）リコー→1998 理研 BSI→2000 統数研で統計的学習・機械学習の研究
- 脳も代数幾何もやっていない！

Outline

Singularities in neural network models

Geometry in neural networks, but not necessarily *algebraic* geometry.

Algebraic geometric approach to probabilistic networks

Algebraic geometry, but not necessarily *neural* networks.

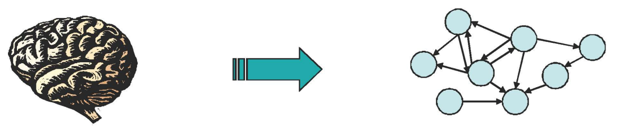
3

- Singularity in neural network model（geometry in neural networks, but not necessarily algebraic geometry）
- 神経回路モデルの特異点…数理モデルに抽象化ニューラルネットワーク
- Algebraic geometric approach to probabilistic network（algebraic geometry, but not necessarily neural network）
- 確率推論に現れるネットワークにおける代数幾何

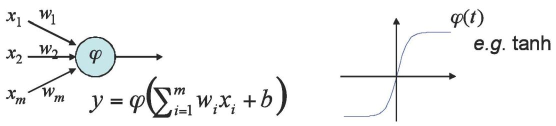
Multilayer Perceptron

Mathematical model of neural computation

Brain as an information processing system



Single neuron model



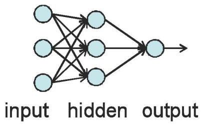
$$y = \varphi\left(\sum_{i=1}^{m} w_i x_i + b\right)$$

4

- Mathematical model of neural computation
- 脳の単純化とは、network of processing units
- 脳のシナプスの複雑な連結→抽象化→ニューラルネットワーク（各 unit で、入力の線形和を引数とした非線形関数の値を出力）
- single neuron model では、出力 y = φ（e.g. tanh）(Σw_i（重み付け、興奮性ならば正、抑制性ならば負）x_i（入力）+b)

Multilayer Perceptron

Multilayer perceptron: feedforward network



$$f(x;\theta) = \sum_{j=1}^{H} b_j\, \sigma(a_j^T x + c_j) + d$$

a_j, b_j, c_j, d: parameters to learn (synaptic learning)

– It is *not* a precise model of biological neural networks, but it may capture some properties of neural computation:
  - Network structure
  - Local, parallel computation
  - Simple computation by units of the same function
  - Existence of hidden units

5

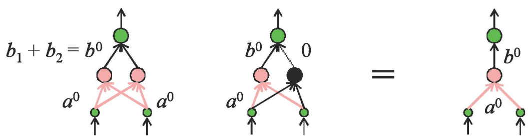
- 多層パーセプトロン（feedforward network: 前向きの信号の流のみを考える）は、入力 → hidden → 出力
- $f(x;\theta) = \Sigma b_j\, \sigma$（e.g. tanh）$(a_j^T x + c_j$（しきい値））$+ d$
- a_j, b_j, c_j, d が学ぶべきパラメータ

Symmetry and Singularity

Model: $f(x;\theta) = b_1\, \varphi(a_1 x) + b_2\, \varphi(a_2 x)$

Target: $f_0(x) = b^0\, \varphi(a^0 x)$

Redundant representation



The parameter set $\{ a_1 = a_2 = a^0,\ b_1 + b_2 = b^0 \}$
$\cup$ $\{ a_1 = a^0, b_1 = b^0, b_2 = 0, a_2 : \text{arbitrary} \}$ realizes $f_0(x)$.

Unidentifiability

– *c.f.* Linearly parameterized model
The parameter is unique even if the model is surplus.
ex.) Polynomial $a_0 + a_1 x + \cdots + a_H x^H$

6

- Symmetry and singularity
- 中間素子が 2 個あるネットワークを考えてみる
- 生物では実現すべき関数より冗長な素子があることが多い
- 冗長なモデルを使うと、パラメータの識別不能性
- parameter space における識別不能性→function space における特異点
- target: $f_0(x) = b_0$ d $(a_0 x)$
- model: $f(x;\theta) = b_1$ d $(a_1 x) + b_2$ d $(a_2 x)$
- パラメータの識別不能性が現れる

こんな感じのネットワーク

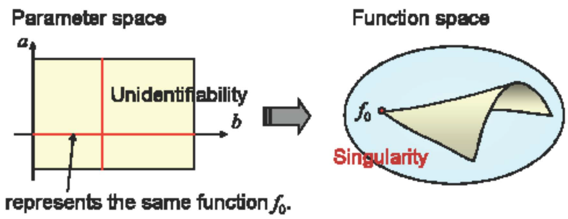
○ →●→◎→

○ →●↑

- 多項式では識別不能性は起こらない
- ノイズがあるときは冗長性により機能が向上するのではないか？

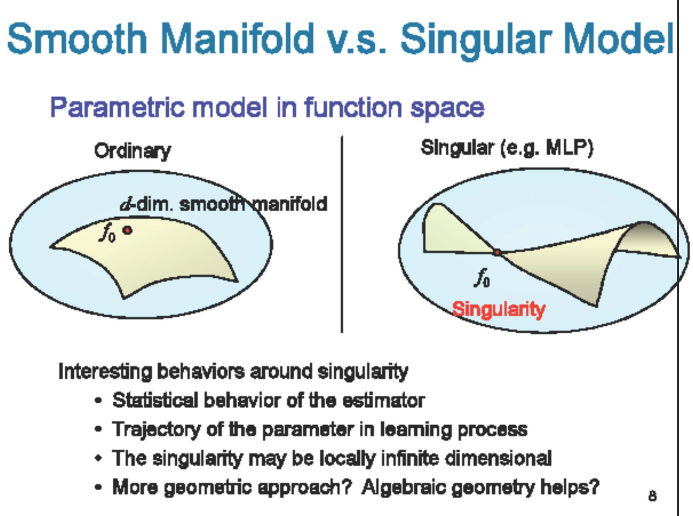
Symmetry and Singularity

Singularity caused by unidentifiability

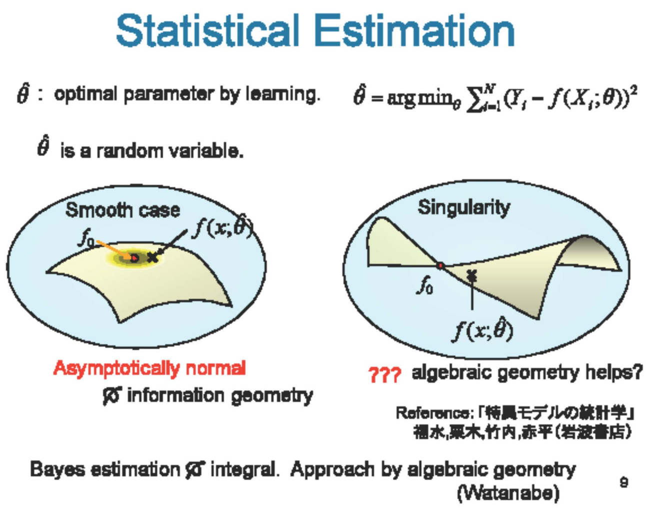


7

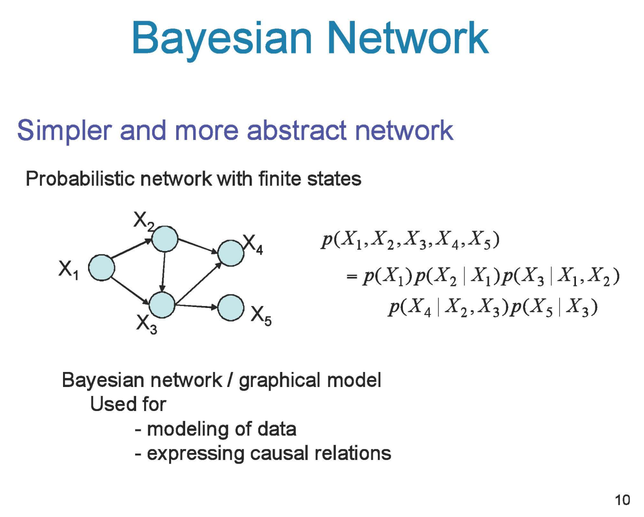
- Singularity caused by unidentifiability
- パラメータ空間→関数空間
- 特異点に対応



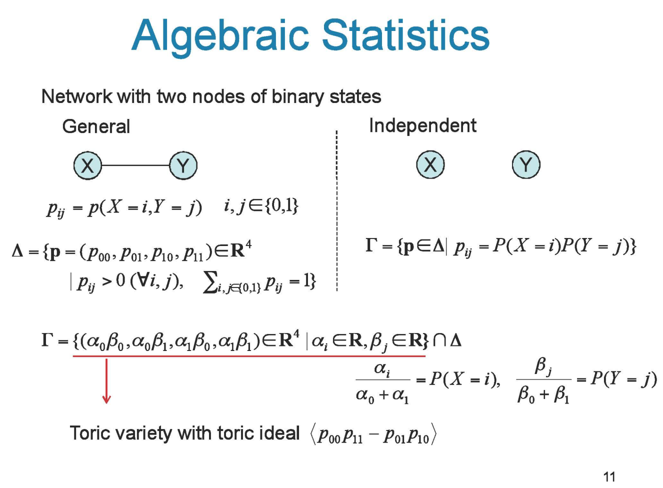
- Smooth manifold vs. singular model
- 普通の Smooth manifold：d 次元、スムーズな manifold
- Singular（e.g. MLP）：特異点が生じると幾何的構造が複雑になる
- 学習の誤差、学習の trajectory が singularity を通らないと学習できない場合がある
- Singularity が局所的に無限次元かもしれない



- 統計的推定
- 多層パーセプトロンは Hebb 則的学習
- 普通は Optimal parameter by learning の 2 乗誤差を少なくする
- ベイズ推定では integral. approach by algebraic geometry
- プラトー現象とは、学習の誤差の減り方に停滞期が存在する→singularity がある程度かかわっているかもしれない



- Bayesian network＝Simpler and more abstract network。より簡単で、それぞれの素子が有限状態だけ取る。条件付き確率を表す（p(X1, X2, X3) = p(X1)p(X2｜X1)p(X3｜X1, X2)）



- Algebraic statistics、2 値の値を取る（p00, p01, p10, p11）
- Toric variety with toric ideal
- 一般に有限状態のグラフィカルモデルが toric variety に対応

Algebraic Statistics

– In general, a graphical model with finite states corresponds to a toric variety.

– Algebraic geometric methods are applied to statistical problems.
    Algebraic statistics.

– Any link with neuro science?

References:

- Pistone, Riccomango and Wynn. *Algebraic Statistics*. 2001.
- Pachter and Sturmfels. *Algebraic Statistics and Computational Biology*. 2005.
- Geiger, Meek and Sturmfels. On the toric algebra of graphical models. *Annals of Statistics* 34 (2006)

  etc.

12

ディスカッション

- 多層パーセプトロンをつなげていけば愛が生まれるか？→精度は良くなる
- 同じ層内で関係を持たせる、または時間遅れの関係性を入れればどうなるか？本質的に性能が変わるか？
- 出力を入力にすることの数学的な意味は？
- ニューラルネットを複雑にして文字認識に使う
- 簡単にフィードバックがある場合、任意のネットワークでは難しい
- Back propagation
- 問題の複雑さとニューラルネットワークの複雑さの関係→ある関数のクラスを考えて、関数を近似する場合→ユニットの数と、近似誤差のワースト値の関係は分かっている
- 中間素子の数、worst case の近似性能の関係、素子を増やす近似精度が上がる
- 特異点があった方が良いのか？ベイズ推論では特異点の方が得＝冗長な方が良い。ニューラルネットでは特異点が必ず出る。事前確率を置くと特異点で得をする

- 加藤：入来先生の「わかるとは何か」　学習＝状態の集合をカテゴライズ、部分集合をどれだけ認識するか　分け方をどれだけよくするか
- 全ての現象を理解することはできない
- 多義化　＝　集合が無限に広がっている
- 概念の構成　＝　集合との対応化
- 入来：わかるとは　階層　論文では「上の階層の原因になっている　あるいは下の階層が上に影響している」として解釈する
- 階層が無限に続く
- ニューラルネット　＝　パラメータ最適化学習
- わかり方の問題、わかる対象の問題
- 可塑性のないシナプスの方が多い
- 愛とか正義の連合野はほとんど活動しない
- 多層パーセプトロンは問いに対して常に正しい答えを出すのか？
- 中間素子のパターンに対する発火状況のエントロピーを用いて学習状態を判断する試みもあった。ただし、それで良いのか？せいぜい数十個のニューロン。検証すべき
- 中間素子の状態が情報の representation ではないか？
- 特異点をはさまれたものの状態？サイエンスとして検証しうるか
- 中間レイヤーをモニタリングすることは可能
- 脳内にはあるか
- パーセプトロンは小脳に似ている、だから有名になった
- 全てのニューロンは可塑性がない。時期によって異なる
- 中間層が何かと結合していない方が難しい
- 近似の他のメジャー　確率的な予測がどれだけ当たるか
- 連続関数の近似
- 多層になったときはもっと違うメジャーが必要
- 制限にして学習をしても結果は良くない　決まった定式化はない
- ランダムにつながったネットワークで自発的に階層ができるか？
- 作れるか？作り込むことは可能。自然に発生する

か？

・ 振動子として素子を考える。階層性やクラスターができる

・ 大脳のように乖離した構造があると機能ができる

・ 本能はどこにあるのか？本能＝原始的な脳。鳥ではわかっている

・ 自己抑制ができる人は大脳が発達している

・どれだけ複雑なことができるのか？やっている研究は？

・文字列認識（手書きの郵便番号の認識）…ニューラルネットワークのパラメータをヒューリスティックに調節したものの一番性能がよかった

・音声認識（時間構造が入る→構造が増えると難しくなる→あまりニューラルネットワークを使われることがなくなってきた）

・ループがある時のパラメータ調整は？

簡単な FB があるような系では、研究がされている

任意のネットワークについてはよくわからない

・自発的に階層を作るようなネットワークはあるのだろうか？

⇒作りこむことは可能だとおもわれる

同期に応じて結合が強化されるようなネットワークは存在している

ある種のクラスターである

constraint が無い状態で、自発的に階層を作るとしたら、大脳の構造も納得できる